数理解析研究所講究録
153巻 1972年 30-38

漸化式と連分数
ー誤差函数の積分を例としてー

京大・数理解析研　　一松 信

1. 発端

Bessel 函数の漸化式

$$x J_{n+1}(x) - 2n J_n(x) + x J_{n-1}(x) = 0 \qquad (1)$$

および，(1)を $n=0,1$ からはじめて $2,3,\cdots$ と上げたときの不安定性は，きわめて有名で，多くの研究がある。この対策として，n が大きいときから下げる方法もあるが，また(1)を連分数

$$\frac{J_n(x)}{J_{n-1}(x)} = \frac{x|}{|2n} + \frac{(-x^2)|}{|2(n+1)} + \frac{(-x^2)|}{|2(n+2)} + \cdots \qquad (2)$$

に書きかえて，$n=0$ から上げてゆくことも可能で，十分に安定である。(2)で n は整数でなくてもよい。$n=\frac{1}{2}$ とすれば $\tan x$ になる。

最近ふとした機会で，誤差函数の逐次積分の計算が必要になった。便宜上，定数係数を除いて，

$$E_0(x) = e^{-x^2}, \qquad E_n(x) = \int_x^\infty E_{n-1}(t)\,dt \qquad (3)$$

とおくことにする。 $E_1(x)$ は erfc x に相当する。この函数列は，つぎの漸化式をみたす： （$n \geqq 1$ に対して）

$$2n\,E_{n+1}(x) + 2x\,E_n(x) - E_{n-1}(x) = 0 \qquad (4)$$

この漸化式で，$n=0$，1から上げてゆくと，やはり不安定性を生じ，x が大きいほど著るしい。 $x=1$ でも，$E_1(x)$ に 10^{-10} の誤差があると，$E_{10}(x)$ には 10^{-7} 程度の相対誤差を生ずる（後述の慢性桁落ち）。 しかし (4) を連分数

$$\frac{E_n(x)}{E_{n-1}(x)} = \frac{1|}{|2x} + \frac{2n|}{|2x} + \frac{2(n+1)|}{|2x} + \cdots \qquad (5)$$

に書きかえると，十分に安定である。じっさいには，あふれを防ぐために，$2(n+k)$ で割って

$$\frac{E_n(x)}{E_{n-1}(x)} = \frac{1|}{|2x} + \frac{1|}{|x/n} + \frac{1/2n|}{|x/(n+1)} + \cdots + \frac{1/2(n+k-1)|}{|x/(n+k)} + \cdots$$

の形にして計算するとよい。*) x が大きいと收束が早い（$x=5$ で 12回くらいで，$E_{10}(x)$ まで 10桁正しく求められる）。 收束域は負の実軸を除く全複素数で，x が 0 に近づくと，收束はおそいが，$x=1$ くらいまでは，どうにか使える（$n=10$，10桁には 110回くらいの反復がいるが）。

この種の性質は，一般的に論ずることが可能である。

*) 近似分数 $\frac{P_k}{Q_k}$ の値は変化しないが，P_k，Q_k 自体が $2^k n(n+1)\cdots(n+k-1)$ で割られるので，大きくなることが防がれる。

2. 形式的連分数への変形

一連の函数系 $f_n(x)$ があり，これらが漸化式

$$\alpha_n f_{n+1}(x) + \beta_n f_n(x) + \gamma_n f_{n-1}(x) = 0 \tag{6}$$

をみたすとする。係数は定数でなくてもよいが，整函数とする。実用上ではたいていxの1次式である（nについても，1次または2次の多項式であることが多い）。(6)は

$$\frac{f_n(x)}{f_{n-1}(x)} = \frac{-\gamma_n}{\beta_n + \alpha_n \dfrac{f_{n+1}(x)}{f_n(x)}}$$

と書きかえられ，これを反復すれば，形式的に連分数

$$\frac{f_n(x)}{f_{n-1}(x)} = \frac{-\gamma_n|}{|\beta_n} + \frac{-\alpha_n\gamma_{n+1}|}{|\beta_{n+1}} + \frac{-\alpha_{n+1}\gamma_{n+2}|}{|\beta_{n+2}} + \cdots \tag{7}$$

をうる。(1)→(2)，(4)→(5)は，いずれも(6)→(7)の特別な場合である。

他の例：本質的に J_n であるが，

$$\psi_c(x) = {}_0F_1(\,;c;x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!\,c(c+1)\cdots(c+k-1)}$$

は，漸化式

$$x\psi_{c+2}(x) + c(c+1)(\psi_{c+1}(x) - \psi_c(x)) = 0$$

をみたす．ゆえに $f_n = \psi_{c+n}$ として，$\alpha_n = x$，$\beta_n = -\gamma_n = (c+n)(c+n-1)$ となるので，つぎの比の連分数の公式をうる：

$$\frac{\psi_c(x)}{\psi_{c-1}(x)}=\frac{(c-1)c|}{|(c-1)c}+\frac{c(c+1)x|}{|c(c+1)}+\frac{(c+1)(c+2)x|}{|(c+1)(c+2)}$$

$$+\cdots=\frac{1|}{|1}+\frac{x/(c-1)|}{|c}+\frac{x|}{|c+1}+\cdots+\frac{x|}{|c+k}+\cdots$$

連分数(7)が収束するためには，もとの函数系において，f_{n+1}/f_n が，$n\to+\infty$ のとき収束することが必要十分である。そのときには，$f_0(x)$ を適当に定めて，順次 $f_n(x)=f_{n-1}(x)\times(7)$ で定めた函数系は，漸化式(6)をみたす。

例. $T_n(x)$ のみたす漸化式 $f_{n+1}(x)-2xf_n(x)+f_{n-1}(x)=0$. $\alpha_n=1$, $\gamma_n=1$, $\beta_n=-2x$. 連分数

$\frac{1|}{|2x}+\frac{1|}{|2x}+\cdots$ の収束域は，$[-1,1]$ を除く全複素数平面である. $x\geqq 1$ のとき，$x=\cosh t$ とおくと，この連分数は $x-\sqrt{x^2-1}=\cosh t-\sinh t=e^{-t}$ に収束する. このとき，$f_n(x)=e^{-nt}$ である。

漸化式を工夫すると，この形で，いろいろな函数の連分数展開を，かなり統一的に導びくことができる.

3. 誤差解析

大ざっぱにいって，漸化式(6)の係数が定数 α,β,γ ならば，(6)の解は $\alpha t^2+\beta t+\gamma=0$ の根を λ,μ として $A\lambda^n+B\mu^n$ の形で与えられる.（重根ならば $(An+B)\lambda^n$ になる）. 不安定

性の生ずる典型的な状況は，$|\mu|<1$，$|\lambda|>1$ で，$A=0$ すなわち $B\mu^n$ が真の解であるときで，$f_n(x)$ の値に僅かの誤差が入っても，$A\neq 0$ となり，$A\lambda^n$ の項が $B\mu^n$ にうちかつ場合である．しかしたとえ $|\lambda|<1$ でも安心できない．$|\lambda|\gg|\mu|$ で，$B\mu^n$ が真の解であるときには，やはりまぎれこんできた $A\lambda^n$ の項が（とくに相対誤差を考えるとき），大きな誤差をひきおこす．(4)の状況は，これに近い．n を定数とすると，(4)から定まる λ,μ は $(-x\pm\sqrt{x^2+2n})/2n$ であり，$|x|$ が n にくらべて大きいと，ほぼ $-x/n$ と $1/2x$ になる．そして $E_n(x)$ の値は $1/2x$ 成分であるから，当然 $n<|x|$ で不安定になる。$n>|x|+1$ になれば，$|\lambda|,|\mu|\leq 1$ となるが，その n に対する正確な $f_n(x)$ を再生して新たに反復しても，やはり $|\lambda|>|\mu|$ のために，精密な値がえにくい。

考えてみれば，小さい量 c を，他の量 a,b の差として計算しようとすれば，ふつうの浮動小数点演算を使う限り桁落ちが避けられないのは当然である。c を精密に求めたければ，$a\times$(小さい量) という方式にしなければならない．(5)のような比の連分数に変換するのは，その点からも自然である。これを「慢性桁落ち」といってもよいだろう。

一方 (1) に対しては，つねに $\lambda\mu=1$ で，有効成分 $|\mu|<1$，無縁成分 $|\lambda|>1$ だから，n の大きい方から下げると，

$\left|\frac{1}{\mu}\right| > \left|\frac{1}{\lambda}\right|$ となって,不安定性が解消する。$|\lambda/\mu|$ が大きく不安定性がひどいほど,逆行操作は安定になる。しかし(4)では,n がきわめて大きいときには,$\lambda = \frac{-1}{\sqrt{2n+x^2}-x} \doteqdot \frac{-1}{\sqrt{2n}}$,$\mu = \frac{1}{\sqrt{2n+x^2}+x} \doteqdot \frac{1}{\sqrt{2n}}$ で,ともに1より小さく,しかも1に近いため,逆行操作でも不安定性は除きにくい。$n \doteqdot |x|$ 付近からはじめれば,かなり安定であるが,$E_n(x)$ の値自体をうることが容易でなく,実用にはなりにくく思われる。

4. $x=0$ の近くの $E_n(x)$ の計算

標題の議論は以上につきるが,$E_n(x)$ 自体の計算で,$x=0$ に近い所では,連分数(5)の収束がおそくて,この方式では計算が困難になるので,一言する。実用上には,たぶんつぎの方式がよいと思われる:

1° $E_1(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \int_0^x e^{-t^2}dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} - e^{-x^2}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{2^k x^{2k+1}}{(2k+1)!!}$ (8)

を求める。x が0にごく近ければ,直接

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2} - \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k x^{2k+1}}{k!\,(2k+1)}$$

とするほうが早い。

2° 漸化式(4)で順次 $E_n(x)$ を求める。

ただしこの結果は,絶対誤差でみる限りは,十分の精度をもつが,相対誤差については,慢性の桁落ちの波及は防げないので,ある程度桁数を多くとる。

$$e_0(x) = e^{-x^2}, \qquad e_n(x) = \int_0^x e_{n-1}(t)\,dt$$

とすると，$e_n(x)$は，べき級数展開

$$e_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \quad x^{2k+n}}{k!\,(2k+1)(2k+2)\cdots(2k+n)}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (2k)!\, x^{2k+n}}{k!\,(2k+n)!} \tag{9}$$

をもつ。一方 e_n と E_n とは，つぎの関係式で結ばれる．

$$e_n(x) + (-1)^{n+1} E_n(x) = \sum_{k=1}^{n} \frac{(-1)^k a_k}{(n-k)!} x^{n-k} \tag{10}$$

ここに $a_k = E_k(0) = \begin{cases} 1/2^{k/2}(k-1)!! & k \text{偶数} \\ \sqrt{\pi}/2^{(k+1)/2}(k-1)!! & k \text{奇数} \end{cases}$

で，これは $a_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$，$a_2 = \frac{1}{2}$ から漸化式 $a_n = \frac{a_{n-2}}{2(n-1)}$ で安定に計算できる．また $n=0$ のときは (10) の右辺は 0 とする．したがって (10) の右辺の多項式と (9) を求めて差をとれば，$E_n(x)$ が求められる．しかし n が大きいと，差をとるときの桁落ちが生じて，x が少し大きいと，十分な精度がでない．10桁くらいならば，$0 \leq x < 1$ ではこの方式，$x \geq 1$ では連分数によって（さらに x が極度に大きいときは，$E_n(x)$ の直接の漸近展開で），一応計算できたが，$x=1$ 付近の精密な値には，なお問題がある．$(x-t)^n E_0(t)$ の積分の形に直して，有限区間の数値積分を実行することも考えたが，まだ十分に検討していない．

付記　$E_n(x)$ で x が小さいとき，漸化式で計算した値の相対誤差が，次第に増加するのは，不安定性というよりも，むしろ当然のことであった．なぜならば，$E_n(x)$ の値自体が（x が少し大きいと，ほぼ $\frac{1}{2x}$ 程度に）減少してゆく．したがって，絶対誤差が前のままでも，相対誤差は自然にます．じっさいには，誤差が打ち消しあって，絶対誤差も少しずつ減少している．値が次第に小さくなる列を，加減算形式の漸化式で計算することは，本質的に精度を悪くする算法であり，不安定性以前の問題であった．

$E_n(x)$ の $x=1$ の付近の値については，整級数によるよりも，倍長演算による漸化式のほうが，まだしも実用的のようである．(4) は (1) と違って，ずっと先へゆけば安定になる性格なので，長桁計算によって，破局をおくらせ，安定になるまでもちこたえることは，意味がある．—— これに対して先へゆくほど不安定性がひどくなる (1) については，破局をいくらかおくらせるだけの長桁計算は，事実上無意味であり，逆行算法が有力と思われる．

文献

- 西村綱子, 誤差関数とその累次積分の計算について, 情報処理学会第12回大会 1971年12月2日, 予稿集 p.157-8
- C.W.Clenshaw, Chebyschev series for mathematical functions, NPL, Math. Tables, vol. 5 (1962), p.1-28.
- A.N.Khovanskii, The application of continued fractions and their generalizations to problems in approximation theory, (英訳) Noordhoff, 1963.
- S.Hitotumatu, On the numerical computation of Bessel functions through continued fraction, Comm. Math. Univ. St. Paul, 16 (1968), 89-113.